

研究成果報告書

事業名（補助金名） : 基盤的研究開発育成事業（若手研究補助金）
研究開発テーマ名 : 粒子間相互作用力決定問題の理論的解析
研究代表者名 : 渡邊道之【北海道大学／学術研究員】
共同研究者名 : 氏名【所属／役職】 … 参画されている研究者全て記載
外部協力者名 : 氏名【所属／役職】 … 参画されている研究者全て記載

（※様式自由）

※ 事業の背景・目的、内容・方法、結果・成果、今後の展開等について、下記の字数以上でまとめてください。（写真・図・表含む）

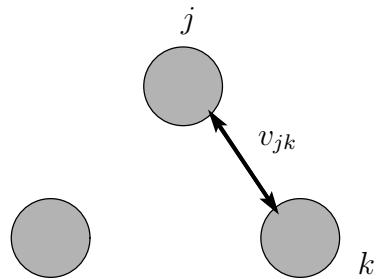
- | | |
|---------------|-------------------|
| ・若手研究補助金 | 5,000字以上（10ページ程度） |
| ・共同研究補助金 | 5,000字以上（10ページ程度） |
| ・研究開発シーズ育成補助金 | 8,000字以上（15ページ程度） |

1 研究の背景・目的，内容・方法

1.1 目的

問題:

同種の粒子が N 個ある体系を考える。粒子間に働く相互作用力 $v_{jk}(x)$, $1 \leq j < k \leq N$ を, 遠方に散乱された粒子の観測データから決定すること。



この問題に対し, 理論的, 数学的な側面からの研究を行い, 各相互作用力を決定するための公式を導くことを目的とする。

1.2 内容・方法

多数の粒子が存在しても, 相互作用がなく, それぞれが独立に運動している場合には, 本質的には一粒子の問題であってあまり大きな困難はない。難しいのは粒子が互いに力を及ぼしあっている場合であって, 古典力学のときもそのような多体問題を解くことは, ごく限られた特別な問題を除き, 一般には不可能であると言われている。量子力学においても同様であって, 厳密な解を求めることができる実際的な問題はほとんど無いと言われている。

今日では, 多体問題に対する様々な近似法が考察されている。本研究ではその中の一つ, ハートリーの近似法と呼ばれている方法で得られる方程式, すなわち時間依存ハートリー方程式 (TDH) 及び時間依存ハートリー・フォック方程式 (TDHF) を利用し, 粒子に働く相互作用力を決定することを解析した。これらの方程式は非線形の方程式であり, 全粒子に働く外力ポテンシャルは方程式の線形部分の係数に, またそれぞれの粒子に働く相互作用ポテンシャルは非線形項の中に現れる。

今, $v_{jk}(x)$, $1 \leq j < k \leq N$ を j 番目と k 番目の粒子に働く相互作用力としよう。このとき N 個の粒子からなる系を記述する N 体 Schrödinger 方程式は

$$i\partial_t \Phi_N = - \sum_{j=1}^N \Delta_{x_j} \Phi_N + \sum_{1 \leq j < k \leq N} v_{jk}(x_j - x_k) \Phi_N, \quad (1.1)$$

となる。ここで $x_j \in \mathbf{R}^n$ は j 番目の粒子の座標であり, Δ_{x_j} は n 次元の x_j 変数に関する Laplacian である。

Hartree 方程式は波動関数 Φ_N を変数分離の形

$$\Phi_N(t, x_1, \dots, x_N) = u_1(t, x_1)u_2(t, x_2) \cdots u_N(t, x_N) \quad (1.2)$$

とおき，これを N 体 Schrödinger 方程式(1.1)へ代入，変分法を利用して導かれる．こうして得られた u_j ($j = 1, \dots, N$) に関する方程式は Hartree 方程式と呼ばれ，次のような方程式になる．

$$i\partial_t u_j = -\Delta u_j + \sum_{k \neq j}^N (v_{jk} * |u_k|^2) u_j. \quad (\text{TDH})$$

ここで $*$ は合成積である．しかし，この波動関数(1.2)は対称性を満たしていないという点で物理的に問題があった．例えば粒子がフェルミ統計に従う場合，波動関数は anti-symmetriy property を満たさなければならない．この問題点を改善するために導かれた方程式が Hartree-Fock 方程式である．波動関数を Slater 行列式

$$\Phi_N(t, x_1, \dots, x_N) = (N!)^{-1/2} \det(u_j(t, x_k))_{1 \leq j, k \leq N}$$

とおき，(1.1)へ代入，変分法を用い，Hartree 方程式を導いたのと同様の計算で次のような Hartree-Fock 方程式が得られる．

$$i\partial_t u_j = -\Delta u_j + \sum_{k \neq j}^N (v_{jk} * |u_k|^2) u_j - \sum_{k \neq j}^N (v_{jk} * u_j \bar{u}_k) u_k. \quad (\text{TDHF})$$

ここで注意しておくべきことは，Hartree-Fock 方程式の解 u_j , $j = 1, 2, \dots, N$ は互いに一次独立でなければならないということである．もし $u_j = c u_k$ であったなら，Slater 行列式はゼロになってしまいこれは物理的に意味のない波動関数となってしまうからである．

本研究ではこれらの近似方程式から数学的に以下で定義される散乱データから方程式の非線形項の中に現れる未知関数 $v_{jk}(x)$ を決定する公式を導くことを研究した．

.....

《 (TDH) と (TDHF) に対する散乱データ 》

$v_{jk}(x)$ は遠方で十分早く減衰しているとしよう．このとき (TDH) と (TDHF) の解 u_j は $t \rightarrow \pm\infty$ としたとき，自由解

$$i\partial_t U_j^{(\pm)}(x, t) = -\Delta U_j^{(\pm)}(x, t), \quad U_j^{(\pm)}(x, 0) = \phi_j^{(\pm)}(x)$$

へ近づくことが期待される．実際， $v_{jk}(x)$ が次の条件

$$|v_{jk}(x)| \leq c|x|^{-\sigma}, \quad 2 \leq \sigma \leq 4 \text{ and } \sigma < n \quad (1.3)$$

を満たすとき (TDH) と (TDHF) の解は自由解へ近づくことがわかった．

定理 1.1. 次を満たすような $\rho > 0$ が存在する . 任意の

$$\phi_j^{(-)} \in \mathcal{D}_\rho := \{\phi \in H^1; \|\phi\|_{H^1} < \rho\}, \quad j = 1, 2, \dots, N,$$

に対し

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \|u_j(\cdot, t) - U_j^{(-)}(\cdot, t)\|_{H^1} = 0$$

を満たす(TDH) 又は(TDHF) の解

$$u_j \in L^3(\mathbf{R}; H^{1,q}) \cap L^\infty(\mathbf{R}; H^1), \quad 1/q = 1/2 + 2/(3n)$$

が唯一つ存在する . さらにこの解は $\phi_j^{(+)}(x) = U_j^{(+)}(x, 0)$ とおけば

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|u_j(\cdot, t) - U_j^{(+)}(\cdot, t)\|_{H^1} = 0$$

を満たす .

写像 $S: \phi^{(-)} \rightarrow \phi^{(+)}$ は散乱作用素と呼ばれて次のように定義される .

$$S_j(\phi)(x) = \phi_j(x) + \frac{1}{i} \int_{\mathbf{R}} e^{itH_0} F_j(\mathbf{u}(t)) dt \quad (1.4)$$

ここで $\phi^{(\pm)} = {}^t(\phi_1^{(\pm)}, \dots, \phi_N^{(\pm)})$ であり $F_j(\mathbf{u}(t))$ は方程式の非線形項を表す . 具体的に書くと , Hartree 方程式(TDH) の場合は

$$F_j(\mathbf{u}(t))(x) = \sum_{k \neq j}^N (v_{jk} * |u_k|^2) u_j, \quad (1.5)$$

となる . ただし $\mathbf{u}(t)$ は Hartree 方程式(TDH) の解である . Hartree-Fock 方程式の場合

$$F_j(\mathbf{u}(t))(x) = \sum_{k \neq j}^N (v_{jk} * |u_k|^2) u_j - \sum_{k \neq j}^N (v_{jk} * u_j \bar{u}_k) u_k \quad (1.6)$$

となる . $\mathbf{u}(t)$ は Hartree-Fock 方程式(TDHF) の解である .

関数の集合 $\{S_j(\phi)(x), \phi_j(x)\}, j = 1, \dots, N$ を散乱データと呼ぶことにしよう . ちなみに上記の定理は Mochizuki [5] の結果の応用である . 類似の結果は Wada [9] でも得られている .

さて , 問題を定式化しよう .

問題 : $\{S_j(\phi)(x), \phi_j(x)\}$ を与えられた関数の集合とし , 未知関数 $v_{jk}(x), 1 \leq j < k \leq N$ を求めよ . 言い換えると $S_j(\phi)(x)$ と $\phi_j(x)$ を既知関数として , 積分方程式(1.4) を $v_{jk}(x)$ について解く .

1.3 背景

Hartree 方程式と Hartree-Fock 方程式は非線形の方程式である。従って、ここで考えている問題は非線形方程式に対する逆散乱問題である。これまでこの問題に関しどのようなことがわかっていたかを簡単に紹介する。

1973 年、Morawetz-Strauss [6] は次のような非線形 Klein-Gordon 方程式

$$u_{tt} - \Delta u + m^2 u + g u^3 = 0, \quad x \in \mathbf{R}^3 \quad (1.7)$$

の逆散乱問題を考えた。ここで m と g は正の定数である。彼らは、この方程式に対する散乱作用素から定数 g が一意的に決定できることを証明し、次のような公式を導いた。

$$g = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{6\varepsilon^4} W[S(2\varepsilon U), S(\varepsilon U)].$$

ここで

$$W(f, g) = \int \left[f \frac{\partial g}{\partial t} - \frac{\partial f}{\partial t} g \right] dx$$

であり、 U は線形 Klein-Gordon 方程式の自由解である。この結果によりはじめて非線形方程式に対する散乱作用素は非線形部分の定数係数を一意的に決定できることがわかった。

1974 年、Strauss [8] はこの結果を変数係数を持つ非線形 Schrödinger 方程式と非線形 Klein-Gordon 方程式へと拡張した。具体的には、次のような非線形 Schrödinger 方程式

$$i \frac{\partial u}{\partial t} = H_0 u + V(x) |u|^{p-1} u, \quad (t, x) \in \mathbf{R} \times \mathbf{R}^n,$$

ここで $H_0 = -\Delta$ であり、 p は適当な条件をみたす整数である、に対し $V(x)$ が対応する散乱作用素から次の公式で決定できることを証明した。

$$V(x_0) = \frac{\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda^{n+2} I[\phi_\lambda]}{\int_{\mathbf{R}} \|e^{-itH_0} \phi\|_{L^{p+1}}^{p+1} dt}, \quad \text{for any } \phi \in H^1 \cap L^{1+1/p}. \quad (1.8)$$

ここで $\phi_\lambda(x) = \phi(\lambda(x - x_0))$, $x, x_0 \in \mathbf{R}^n$ であり ,

$$I[\phi] := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\varepsilon^p} ((S - I)(\varepsilon\phi), \phi) \quad (1.9)$$

である .

1997 年以降 , Weder ([13], [14], [17], [15], [16], [18], [19], [20]) はこれまでの結果をより一般の非線形 Schrödinger 方程式と非線形 Klein-Gordon へと拡張した . 散乱作用素は非線形部分の係数のみならず , 線形部分の係数をも決定できることを証明し , さらにそれらを求める公式も導いた .

これまで紹介してきた結果はいわゆるべき乗型といわれる非線形項を持つ方程式に対してである . これらの結果の Hartree 型すなわち $(v * |u|^2)u$ の形を持つ非線形方程式の逆散乱問題は ([10], [11], [12]) で研究されている . 底べき乗型の場合と事情がことなり , Hartree 型非線形項の v を具体的に求める公式はまだ得られていない . ただし , 特殊なケースであるが , $v = \lambda|x|^{-\sigma}$ の場合は [12] の中で公式が得られている . 具体的には , 次のような方程式

$$i\partial_t u = H_0 u + \lambda(|x|^{-\sigma} * |u|^2)u, \quad H_0 = -\Delta, \quad \lambda > 0, \quad (1.10)$$

に対し , 散乱作用素 S から一意的に σ と λ を求めることができ , それらは次の公式によって求めることができる .

$$\sigma = 2n + 2 + \log \frac{T[\phi_e]}{T[\phi]}, \quad (1.11)$$

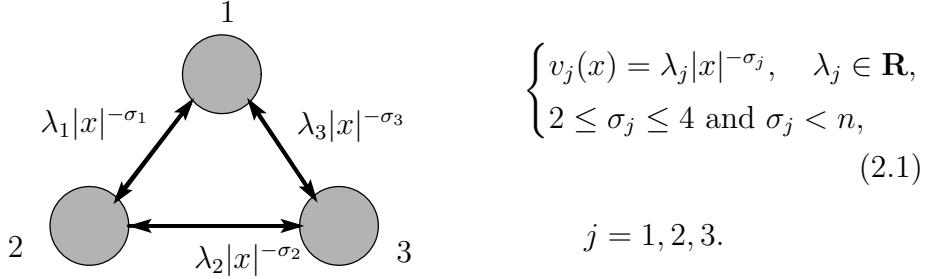
$$\lambda = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\varepsilon^3} \frac{\|(S - I)(\varepsilon\phi)\|_{H^1}}{\left\| \int_{\mathbf{R}} e^{itH_0} (|x|^{-\sigma} + |e^{-itH_0}\phi|^2) e^{-itH_0} dt \right\|_{H^1}}, \quad \varepsilon > 0. \quad (1.12)$$

$\phi \in H^1$ は任意の関数である . $T[\phi] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\varepsilon^3} ((S - I)(\varepsilon\phi), \phi)$, $\phi_e(x) = \phi(ex)$ である .

本研究はこの結果を物理で本来得られている Hartree 方程式及び Hartree-Fock 方程式の場合へ応用することを考察し , 以下のような結果を得た .

2 結果・成果

粒子が 3 個の場合で相互作用力が以下のような形で書けている場合を考える .



S_j を各方程式に対する散乱作用素とする . また

$$\mathcal{T}_j[\phi] := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{i}{\varepsilon^3} ([S_j - I_j](\phi), \phi_j)_{L^2} \quad (2.2)$$

とおく . ここで $\phi = (\phi_1, \phi_2, \phi_3)$, $I_j(\phi) = \phi_j$ であり , (\cdot, \cdot) は $L^2(\mathbf{R}^n)$ 内積を表す . さらに , γ は Fourier 変換したものが $C_0^\infty(\mathbf{R}^n)$ となるような急減少関数の集合とする .

2.1 Hartree 方程式の場合

Hartree 方程式(TDH) の場合には次の結果を得た .

定理 2.1. 任意の $0 \neq \phi_j \in H^1$, $1 \leq j \leq 3$ と任意の $1 \neq R > 0$ に対し , 次の公式が成り立つ .

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= 2n + 2 + \log_R \left(\frac{\mathcal{T}_1[\phi_R] + \mathcal{T}_2[\phi_R] - \mathcal{T}_3[\phi_R]}{\mathcal{T}_1[\phi] + \mathcal{T}_2[\phi] - \mathcal{T}_3[\phi]} \right), \\ \sigma_2 &= 2n + 2 + \log_R \left(\frac{\mathcal{T}_2[\phi_R] + \mathcal{T}_3[\phi_R] - \mathcal{T}_1[\phi_R]}{\mathcal{T}_2[\phi] + \mathcal{T}_3[\phi] - \mathcal{T}_1[\phi]} \right), \\ \sigma_3 &= 2n + 2 + \log_R \left(\frac{\mathcal{T}_3[\phi_R] + \mathcal{T}_1[\phi_R] - \mathcal{T}_2[\phi_R]}{\mathcal{T}_3[\phi] + \mathcal{T}_1[\phi] - \mathcal{T}_2[\phi]} \right). \end{aligned}$$

ここで $\phi_R(x) = \phi(Rx)$ であり ,

$$\lambda_1 = \frac{1}{2a_1}(\mathcal{T}_1[\phi] + \mathcal{T}_2[\phi] - \mathcal{T}_3[\phi]),$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{2a_2}(\mathcal{T}_2[\phi] + \mathcal{T}_3[\phi] - \mathcal{T}_1[\phi]),$$

$$\lambda_3 = \frac{1}{2a_3}(\mathcal{T}_3[\phi] + \mathcal{T}_1[\phi] - \mathcal{T}_2[\phi]).$$

さらに

$$a_1 = \int_{\mathbf{R}} \int_{\mathbf{R}^n} (|x|^{-\sigma_1} * |U_1(\cdot, t)|^2)(x) |U_2(x, t)|^2 dx dt,$$

$$a_2 = \int_{\mathbf{R}} \int_{\mathbf{R}^n} (|x|^{-\sigma_2} * |U_2(\cdot, t)|^2)(x) |U_3(x, t)|^2 dx dt,$$

$$a_3 = \int_{\mathbf{R}} \int_{\mathbf{R}^n} (|x|^{-\sigma_3} * |U_3(\cdot, t)|^2)(x) |U_1(x, t)|^2 dx dt$$

である .

2.2 Hartree-Fock 方程式の場合

Hartree-Fock 方程式の場合には次のような結果を得た .

定理 2.2. 以下の公式が成り立つような

$$\phi \in \mathcal{B} := \{\phi = (\phi_1, \phi_2, \phi_3), \phi_j \in \mathcal{Y}; \phi_j \neq c\phi_k, 1 \leq k, l \leq 3, c \in \mathbf{R}\}$$

が存在する . 任意の正の実数 $R \neq 1$ に対し ,

$$\sigma_1 = 2n + 2 + \log_R \left(\frac{\mathcal{T}_1[\phi_R] + \mathcal{T}_2[\phi_R] - \mathcal{T}_3[\phi_R]}{\mathcal{T}_1[\phi] + \mathcal{T}_2[\phi] - \mathcal{T}_3[\phi]} \right),$$

$$\sigma_2 = 2n + 2 + \log_R \left(\frac{\mathcal{T}_2[\phi_R] + \mathcal{T}_3[\phi_R] - \mathcal{T}_1[\phi_R]}{\mathcal{T}_2[\phi] + \mathcal{T}_3[\phi] - \mathcal{T}_1[\phi]} \right),$$

$$\sigma_3 = 2n + 2 + \log_R \left(\frac{\mathcal{T}_3[\phi_R] + \mathcal{T}_1[\phi_R] - \mathcal{T}_2[\phi_R]}{\mathcal{T}_3[\phi] + \mathcal{T}_1[\phi] - \mathcal{T}_2[\phi]} \right),$$

ここで $\phi_R(x) = \phi(Rx)$ であり , さらに

$$\lambda_1 = \frac{1}{2(a_1 - b_1)}(\mathcal{T}_1[\phi] + \mathcal{T}_2[\phi] - \mathcal{T}_3[\phi]),$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{2(a_2 - b_2)}(\mathcal{T}_2[\phi] + \mathcal{T}_3[\phi] - \mathcal{T}_1[\phi]),$$

$$\lambda_3 = \frac{1}{2(a_3 - b_3)}(\mathcal{T}_3[\phi] + \mathcal{T}_1[\phi] - \mathcal{T}_2[\phi])$$

が成り立つ . ここで ,

$$\begin{aligned}
 a_1 &= \int_{\mathbf{R}} \int_{\mathbf{R}^n} (|x|^{-\sigma_1} * |U_1(\cdot, t)|^2)(x) |U_2(x, t)|^2 dx dt, \\
 a_2 &= \int_{\mathbf{R}} \int_{\mathbf{R}^n} (|x|^{-\sigma_2} * |U_2(\cdot, t)|^2)(x) |U_3(x, t)|^2 dx dt, \\
 a_3 &= \int_{\mathbf{R}} \int_{\mathbf{R}^n} (|x|^{-\sigma_3} * |U_3(\cdot, t)|^2)(x) |U_1(x, t)|^2 dx dt, \\
 b_1 &= \int_{\mathbf{R}} \int_{\mathbf{R}^n} (|x|^{-\sigma_1} * U_1(\cdot, t) \overline{U_2}(\cdot, t))(x) \overline{U_1}(x, t) U_2(x, t) dx dt, \\
 b_2 &= \int_{\mathbf{R}} \int_{\mathbf{R}^n} (|x|^{-\sigma_2} * U_2(\cdot, t) \overline{U_3}(\cdot, t))(x) \overline{U_2}(x, t) U_3(x, t) dx dt, \\
 b_3 &= \int_{\mathbf{R}} \int_{\mathbf{R}^n} (|x|^{-\sigma_3} * U_3(\cdot, t) \overline{U_1}(\cdot, t))(x) \overline{U_1}(x, t) U_3(x, t) dx dt
 \end{aligned}$$

である .

注意 1. 粒子が 4 個以上の場合 , 同様の公式を得ることは難しい . なぜなら , 問題で既知関数としているものは $\{S_j(\phi)(x), \phi_j(x)\}$, $1 \leq j < k \leq N$ であり , その数は N 個である . 一方未知関数は v_{jk} であり , その数は ${}_nC_2 = n(n-1)/2$ 個となるため与えられた関数より未知の関数の方が多くなっているためである . 粒子が 3 個の場合だけ既知関数の数と未知関数の数が等しくなっているのがこの問題の特徴である .

3 今後の展開

本研究で粒子が3個の場合は相互作用力を散乱データから決定できることがわかった。今後の展開は次のようになる。

- 相互作用力だけでなく全粒子に働くポテンシャルも散乱データから決定できるかを解析する。
- 本研究では遠方で十分早く減衰するような相互作用力しか考察しなかったが、クーロン力に代表されるようなもととゆっくり減衰する相互作用力に対しても散乱データから決定できるかを解析する。
- ハートリーの近似法以外の方法で得られる方程式に対して、本研究で得られた公式の導出法が応用できるかを検討してゆく。

参考文献

- [1] T. Aktosun, V. G. Papanicolaou and V. Zisis, Inverse scattering on the line for a generalized nonlinear Schrödinger equation, *Inverse Problems* **20** (2004), 1267–1280.
- [2] H. Isozaki, On the existence of solutions to time dependent Hartree-Fock equations, *Publ. RIMS, Kyoto Univ.* **19** (1983), 107-115.
- [3] E. Jalade, Inverse problem for a nonlinear Helmholtz equation, *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire* **21** (2004), 517–531.
- [4] P. Kramer and M. Saraceno, Geometry of the time-dependent variational principle in quantum mechanics, *Lecture Notes in Phys.* **140** (Springer, 1981).
- [5] K. Mochizuki, On small data scattering with cubic convolution nonlinearity, *J. Math. Soc. Japan.* **41** (1989), 143–160.
- [6] C. S. Morawetz and W. A. Strauss, On a nonlinear scattering operator, *Comm. Pure Appl. Math.* **26** (1973), 47-54.
- [7] H. Sasaki and M. Watanabe, Uniqueness on identification of cubic convolution nonlinearity, *J. Math. Anal. Appl.* **309** (2005), 294-306.
- [8] W. A. Strauss, Non linear scattering theory, in "Scattering Theory in Mathematical Physics", pp. 53–78. J. A. Lavita and J.-P. Marchand, editors, D. Reidel, Dordrecht-Holland / Boston 1974.
- [9] T. Wada, Scattering theory for time-dependent Hartree-Fock type equation, *Osaka J. Math* **36** (1999), 905-918.
- [10] M. Watanabe, Inverse scattering for the nonlinear Schrödinger equation with cubic convolution nonlinearity, *Tokyo J. Math* **24** (2001), 59-67.
- [11] M. Watanabe, Uniqueness in the inverse scattering problem for the Hartree type equation *Proc. Japan Acad. Ser A.* **77** (2001), 143–146.
- [12] M. Watanabe, Reconstruction of the Hartree-type nonlinearity, *Inverse Problems* **18** (2002), 1477-1481.
- [13] R. Weder, Inverse scattering for the nonlinear Schrödinger equation, *Comm. Partial Differential Equations* **22** (1997), 2089-2103 .

- [14] R. Weder, $L^p - L^{\tilde{p}}$ estimates for the Schrödinger equation on the line and inverse scattering for the nonlinear Schrödinger equation with a potential, *J. Func. Anal.* **170** (2000), 37-68 .
- [15] R. Weder, Inverse scattering on the line for the nonlinear Klein-Gordon equation with a potential, *J. Math. Anal. Appl.* **252** (2000), 102-123 .
- [16] R. Weder, Inverse Scattering for the Nonlinear Schrödinger Equation II. Reconstruction of the Potential and the Nonlinearity in the multidimensional case, *Proc. Amer. Math. Soc.* **129** (2001), 3637–3645
- [17] R. Weder, Inverse scattering for the non-linear Schrödinger equation: reconstruction of the potential and the non-linearity, *Math. Meth. Appl. Sci.* **24** (2001), 245-254 .
- [18] R. Weder, Multidimensional inverse scattering for the nonlinear Klein-Gordon equation with a potential, *J. Differential Equations* **184** (2002), 62-77 .
- [19] R. Weder, Scattering for the forced non-linear Schrödinger equation with a potential on the half-line, *Math. Methods Appl. Sci.* **28** (2005), 1219-1236.
- [20] R. Weder, The forced non-linear Schrödinger equation with a potential on the half-line, *Math. Methods Appl. Sci.* **28** (2005), 1237-1255.